

Výpočtové stredisko SAV



Správa o činnosti organizácie SAV za rok 2017

Bratislava
január 2018

Obsah osnovy Správy o činnosti organizácie SAV za rok 2017

1. Základné údaje o organizácii
2. Vedecká činnosť
3. Doktorandské štúdium, iná pedagogická činnosť a budovanie ľudských zdrojov pre vedu a techniku
4. Medzinárodná vedecká spolupráca
5. Vedná politika
6. Spolupráca s VŠ a inými subjektmi v oblasti vedy a techniky
7. Spolupráca s aplikačnou a hospodárskou sférou
8. Aktivity pre Národnú radu SR, vládu SR, ústredné orgány štátnej správy SR a iné organizácie
9. Vedecko-organizačné a popularizačné aktivity
10. Činnosť knižnično-informačného pracoviska
11. Aktivity v orgánoch SAV
12. Hospodárenie organizácie
13. Nadácie a fondy pri organizácii SAV
14. Iné významné činnosti organizácie SAV
15. Vyznamenania, ocenenia a ceny udelené organizácii a pracovníkom organizácie SAV
16. Poskytovanie informácií v súlade so zákonom o slobodnom prístupe k informáciám
17. Problémy a podnety pre činnosť SAV

PRÍLOHY

- A Zoznam zamestnancov a doktorandov organizácie k 31.12.2017*
- B Projekty riešené v organizácii*
- C Publikáčná činnosť organizácie*
- D Údaje o pedagogickej činnosti organizácie*
- E Medzinárodná mobilita organizácie*
- F Vedecko-popularizačná činnosť pracovníkov organizácie SAV*

1. Základné údaje o organizácii

1.1. Kontaktné údaje

Názov: Výpočtové stredisko SAV
Riaditeľ: Mgr. Lukáš Demovič, PhD.
Zástupca riaditeľa: Ing. Michal Kadúc
Vedecký tajomník: neuvedený
Predseda vedeckej rady: neuvedený
Člen snemu SAV: Ing. Michal Kadúc
Adresa: Dúbravská cesta 9, 845 35 Bratislava

<http://www.vs.sav.sk>

Tel.: 02/ 3229 3111

Fax: 02/ 3229 3103

E-mail: vssav@savba.sk

Názvy a adresy detašovaných pracovísk:

- **Výpočtové stredisko SAV, Žilina**
Univerzitná 3833, 010 01 Žilina

Vedúci detašovaných pracovísk:

- **Výpočtové stredisko SAV, Žilina**
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.

Typ organizácie: Príspevková od roku 2007

1.2. Údaje o zamestnancoch

Tabuľka 1a Počet a štruktúra zamestnancov

Štruktúra zamestnancov	K	K		K do 35 rokov		F	P	T
		M	Ž	M	Ž			
Celkový počet zamestnancov	32	23	9	6	3	32	25,8	3,32
Vedeckí pracovníci	6	6	0	2	0	6	4,02	3,32
Odborní pracovníci VŠ (výskumní a vývojoví zamestnanci ¹)	0	0	0	0	0	0	0	0
Odborní pracovníci VŠ (ostatní zamestnanci ²)	19	13	6	3	3	19	16,14	0
Odborní pracovníci ÚS	5	4	1	1	0	5	5	0
Ostatní pracovníci	2	0	2	0	0	2	0,64	0

¹ odmeňovaní podľa 553/2003 Z.z., príloha č. 5

² odmeňovaní podľa 553/2003 Z.z., príloha č. 3 a č. 4

K – kmeňový stav zamestnancov v pracovnom pomere k 31.12.2017 (uvádzať zamestnancov v pracovnom pomere, vrátane riadnej materskej dovolenky, zamestnancov pôsobiacich v zahraničí, v štátnych funkciách, členov

Predsedníctva SAV, zamestnancov pôsobiach v zastupiteľských zboroch)

F – fyzický stav zamestnancov k 31.12.2017 (bez riadnej materskej dovolenky, zamestnancov pôsobiach v zahraničí v štátnych funkciách, členov Predsedníctva SAV, zamestnancov pôsobiach v zastupiteľských zboroch)

P – celoročný priemerný prepočítaný počet zamestnancov

T – celoročný priemerný prepočítaný počet riešiteľov projektov

M, Ž – muži, ženy

Tabuľka 1b Štruktúra vedeckých pracovníkov (kmeňový stav k 31.12.2017)

Rodová skladba	Pracovníci s hodnosťou				Vedeckí pracovníci v stupňoch		
	DrSc.	CSc./PhD.	prof.	doc.	I.	II.a.	II.b.
Muži	2	8	2	2	2	1	3
Ženy	0	0	0	0	0	0	0

Tabuľka 1c Štruktúra pracovníkov podľa veku a rodu, ktorí sú riešiteľmi projektov

Veková štruktúra (roky)	< 31	31-35	36-40	41-45	46-50	51-55	56-60	61-65	> 65
Muži	0	2	2	0	0	0	0	1	1
Ženy	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabuľka 1d Priemerný vek zamestnancov organizácie k 31.12.2017

	Kmeňoví zamestnanci		Vedeckí pracovníci		Riešitelia projektov	
	A	B	A	B	A	B
Muži	47,6	45,0	48,5	41,3	48,5	41,3
Ženy	44,1	43,1	0,0	0,0	0,0	0,0
Spolu	46,6	44,5	48,5	41,3	48,5	41,3

A - Prepočet bez zohľadnenia úväzkov zamestnancov

B - Prepočet so zohľadnením úväzkov zamestnancov

1.3. Iné dôležité informácie k základným údajom o organizácii a zmeny za posledné obdobie (v zameraní, v organizačnej štruktúre a pod.)

2. Vedecká činnosť

2.1. Domáce projekty

Tabuľka 2a Domáce projekty riešené v roku 2017

ŠTRUKTÚRA PROJEKTOV	Počet		Čerpané financie (€)					
	A	B	A				B	
			Zo zdrojov SAV		Z iných zdrojov		Zo zdrojov SAV	Z iných zdrojov
			Spolu	Pre organizáciu	Spolu	Pre organizáciu		
1. Projekty VEGA	0	1	-	-	-	-	4706	-
2. Projekty APVV	0	0	-	-	-	-	-	-
3. Projekty OP ŠF	2	0	-	-	-	-	-	-
4. Projekty SASPRO	0	0	-	-	-	-	-	-
5. Projekty centier excelentnosti SAV	0	0	-	-	-	-	-	-
6. Iné projekty (FM EHP, ŠPVV, Vedecko-technické projekty, ESF, na objednávku rezortov a pod.)	3	1	28000	28000	-	-	-	-

A - organizácia je nositeľom projektu

B - organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu

Tabuľka 2b Domáce projekty podané v roku 2017

Štruktúra projektov	Miesto podania	Organizácia je nositeľom projektu	Organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu
1. Účasť na nových výzvach APVV r. 2017	-		
2. Projekty výziev OP ŠF podané r. 2017	Bratislava		
	Regióny		

2.2. Medzinárodné projekty

2.2.1. Medzinárodné projekty riešené v roku 2017

Tabuľka 2c Medzinárodné projekty riešené v roku 2017

ŠTRUKTÚRA PROJEKTOV	Počet		Čerpané financie (€)					
	A	B	A				B	
			Zo zdrojov SAV		Z iných zdrojov		Zo zdrojov SAV	Z iných zdrojov
			Spolu	Pre organizáciu	Spolu	Pre organizáciu		
1. Projekty 7. RP EÚ a Horizont 2020	0	2	-	-	-	-	-	58380
2. Projekty ERA.NET, ESA, JRP	0	0	-	-	-	-	-	-
3. Projekty COST	0	0	-	-	-	-	-	-
4. Projekty EUREKA, NATO, UNESCO, CERN, IAEA, IVF, ERDF a iné	0	0	-	-	-	-	-	-
5. Projekty v rámci medzivládnych dohôd	0	0	-	-	-	-	-	-
6. Bilaterálne projekty MAD	0	0	-	-	-	-	-	-
7. Bilaterálne projekty ostatné	0	0	-	-	-	-	-	-
8. Podpora MVTs z národných zdrojov (SAV, APVV a iné)	0	0	-	-	-	-	-	-
9. Iné projekty	0	0	-	-	-	-	-	-

A - organizácia je nositeľom projektu

B - organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu

2.2.2. Medzinárodné projekty Horizont 2020 podané v roku 2017

Tabuľka 2d Počet projektov Horizont 2020 v roku 2017

	A	B
Počet podaných projektov Horizont 2020		

A - organizácia je nositeľom projektu

B - organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu

Údaje k domácim a medzinárodným projektom sú uvedené v Prílohe B.

2.2.3. Zámery na čerpanie štrukturálnych fondov EÚ v ďalších výzvach

2.3. Najvýznamnejšie výsledky vedeckej práce (maximálne 1000 znakov + 1 obrázok; bibliografický údaj uvádzajte rovnako ako v zozname publikačnej činnosti, vrátane IF)

2.3.1. Základný výskum

2.3.2. Aplikačný typ

2.3.3. Medzinárodné vedecké projekty

2.4. Publikačná činnosť (zoznam je uvedený v prílohe C)

Tabuľka 2e Štatistika vybraných kategórií publikácií

PUBLIKAČNÁ A EDIČNÁ ČINNOSŤ	Počet v r. 2017/ doplňky z r. 2016
1. Vedecké monografie a monografické štúdie vydané v domácich vydavateľstvách (AAB, ABB)	0 / 0
2. Vedecké monografie a monografické štúdie vydané v zahraničných vydavateľstvách (AAA, ABA)	0 / 0
3. Odborné monografie, vysokoškolské učebnice a učebné texty vydané v domácich vydavateľstvách (BAB, ACB, CAB)	0 / 0
4. Odborné monografie a vysokoškolské učebnice a učebné texty vydané v zahraničných vydavateľstvách (BAA, ACA, CAA)	0 / 0
5. Kapitoly vo vedeckých monografiách vydaných v domácich vydavateľstvách (ABD)	0 / 0
6. Kapitoly vo vedeckých monografiách vydaných v zahraničných vydavateľstvách (ABC)	0 / 0
7. Kapitoly v odborných monografiách, vysokoškolských učebniciach a učebných textoch vydaných v domácich vydavateľstvách (BBB, ACD)	0 / 0
8. Kapitoly v odborných monografiách, vysokoškolských učebniciach a učebných textoch vydaných v zahraničných vydavateľstvách (BBA, ACC)	0 / 0
9. Vedecké práce registrované v Current Contents Connect (ADCA, ADCB, ADDA, ADDB)	5 / 0
10. Vedecké práce registrované vo Web of Science Core Collection alebo Scopus (ADMA, ADMB, ADNA, ADNB)	0 / 0
11. Vedecké práce v ostatných domácich časopisoch (ADFA, ADFB)	0 / 0
12. Vedecké práce v ostatných zahraničných časopisoch (ADEA, ADEB)	0 / 0
13. Vedecké práce v domácich recenzovaných zborníkoch (AEDA)	0 / 0
14. Vedecké práce v zahraničných recenzovaných zborníkoch (AECA)	0 / 0
15. Publikované príspevky na domácich vedeckých konferenciách (AFB, AFD)	0 / 0
16. Publikované príspevky na zahraničných vedeckých konferenciách (AFA, AFC)	0 / 0
17. Vydané periodiká evidované v CCC, WoS Core Collection, SCOPUS	0
18. Ostatné vydané periodiká	0
19. Zostavovateľské práce knižného charakteru (FAI)	0 / 0
20. Preklady vedeckých a odborných textov (EAJ)	0 / 0
21. Heslá v odborných terminologických slovníkoch a encyklopédiách (BDA, BDB)	0 / 0
22. Recenzie v časopisoch a zborníkoch (EDI)	0 / 0

Evidujú len tie práce zamestnancov a doktorandov, v ktorých je uvedená afiliácia k organizácii

Tabuľka 2f Štatistika vedeckých prác podľa kvartilu vedeckého časopisu

Kvartil vedeckého časopisu	Q1	Q2	Q3	Q4	Spolu
Podľa IF z r. 2016 (zdroj JCR) <i>Počet článkov / doplnky 2015</i>	0 / 0	0 / 0	0 / 0	0 / 0	0 / 0
Podľa SJR z r. 2016 (zdroj Scimago) <i>Počet článkov / doplnky 2015</i>	0 / 0	0 / 0	0 / 0	0 / 0	0 / 0

Tabuľka 2g Ohlasy

OHLASY	Počet v r. 2016/ doplnky z r. 2015
Citácie vo WOS (1.1, 2.1)	38 / 0
Citácie v SCOPUS (1.2, 2.2)	0 / 0
Citácie v iných citačných indexoch a databázach (9, 10, 3.2, 4.2)	0 / 0
Citácie v publikáciách neregistrovaných v citačných indexoch (3, 4, 3.1, 4.1)	0 / 0
Recenzie na práce autorov z organizácie (5, 6, 7, 8)	0 / 0

2.5. Aktívna účasť na vedeckých podujatiach

Tabuľka 2h Vedecké podujatia

Prednášky a vývesky na medzinárodných vedeckých podujatiach	
Prednášky a vývesky na domácich vedeckých podujatiach	

2.6. Vyžiadané prednášky

2.6.1. Vyžiadané prednášky na medzinárodných vedeckých podujatiach

2.6.2. Vyžiadané prednášky na domácich vedeckých podujatiach

2.6.3. Vyžiadané prednášky na významných vedeckých inštitúciách

Ak boli príspevky publikované, sú súčasťou prílohy C, kategória (AFC, AFD, AFE, AFF, AFG, AFH)

2.7. Patentová a licenčná činnosť na Slovensku a v zahraničí v roku 2017

2.7.1. Vynálezy, na ktoré bol udelený patent

2.7.2. Prihlásené vynálezy

2.7.3. Predané licencie

2.7.4. Realizované patenty

Finančný prínos pre organizáciu SAV v roku 2017 a súčet za predošlé roky sa neuvádzajú, ak je zverejnenie v rozpore so zmluvou súvisiacou s realizáciou patentu.

2.8. Účasť expertov na hodnotení národných projektov (APVV, VEGA a iných)

Tabuľka 2i Experti hodnotiaci národné projekty

Meno pracovníka	Typ programu/projektu/výzvy	Počet hodnotených projektov
-----------------	-----------------------------	-----------------------------------

Šperka Martin	Operačný program Výskum a inovácie, (OPVaI)VA/DP/2016/1.2.1-02	5
---------------	---	---

2.9. Účasť na spracovaní hesiel do encyklopédie Beliana

Počet autorov hesiel: 0

2.10. Recenzovanie publikácií a príspevkov vo vedeckých časopisoch

Tabuľka 2j Počet recenzovaných monografií, článkov, zborníkov

Meno pracovníka	Knížné monografie		Príspevky v časopisoch			Zborníky	
	Domáce	Zahra- ničné	WoS, SCOPUS	Iné databázy	Ostatné	Domáce	Zahra- ničné
Noga Jozef	0	0	6	0	0	0	0
Spolu	0	0	6	0	0	0	0

2.11. Iné informácie k vedeckej činnosti.

3. Doktorandské štúdium, iná pedagogická činnosť a budovanie ľudských zdrojov pre vedu a techniku

3.1. Údaje o doktorandskom štúdiu

Tabuľka 3a Počet doktorandov v roku 2017

Forma	Počet k 31.12.2017						Počet ukončených doktorantúr v r. 2017					
	Doktorandi						Ukončenie z dôvodov					
	celkový počet		z toho novoprijatí		po skúške		ukončenie úspešnou obhajobou		predčasné ukončenie		neúspešné ukončenie	
	M	Ž	M	Ž	M	Ž	M	Ž	M	Ž	M	Ž
Denná zo zdrojov SAV	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Denná z iných zdrojov	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Externá	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Spolu	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Súhrn	0		0		0		0		0		0	

Uvádzajte len doktorandov organizácie ako externej vzdelávacej inštitúcie

3.2. Zmena formy doktorandského štúdia

Tabuľka 3b Počty preradení z dennej formy na externú a z externej na dennú

Pôvodná forma	Denná z prostriedkov SAV	Denná z prostriedkov SAV	Denná z iných zdrojov	Denná z iných zdrojov	Externá	Externá
Nová forma	Denná z iných zdrojov	Externá	Denná z prostriedkov SAV	Externá	Denná z prostriedkov SAV	Denná z iných zdrojov
Počet	0	0	0	0	0	0

3.3. Zoznam doktorandov, ktorí ukončili doktorandské štúdium úspešnou obhajobou

Tabuľka 3c Menný zoznam ukončených doktorandov v roku 2017 úspešnou obhajobou

Meno doktoranda	Forma DŠ	Mesiac, rok nástupu na DŠ	Mesiac, rok obhajoby	Číslo a názov študijného odboru	Meno a organizácia školiteľa	Fakulta udeľujúca vedeckú hodnotu
-----------------	----------	---------------------------	----------------------	---------------------------------	------------------------------	-----------------------------------

Zoznam interných a externých doktorandov je uvedený v prílohe A.

3.4. Medzinárodné doktorandské štúdium

Tabuľka 3d Počet študentov v medzinárodných programoch doktorandského štúdia

Cotutelle	Co-direction	Iné	Zahraniční doktorandi
0	0	0	0

3.5. Zoznam akreditovaných študijných odborov s uvedením VŠ

Tabuľka 3e Zoznam akreditovaných študijných odborov s uvedením univerzity/vysokej školy a fakulty, kde sa doktorandský študijný program uskutočňuje

Názov študijného odboru (ŠO)	Číslo ŠO	Doktorandské štúdium uskutočňované na (univerzita/vysoká škola a fakulta)
-------------------------------------	-----------------	--

Tabuľka 3f Účasť na pedagogickom procese

Menný prehľad pracovníkov, ktorí boli menovaní do spoločných odborových komisií pre doktorandské štúdium	Menný prehľad pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia vedeckých rád univerzít, správnych rád univerzít a fakúlt	Menný prehľad pracovníkov, ktorí získali vyššiu vedeckú, pedagogickú hodnotu alebo vyšší kvalifikačný stupeň
prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (chemická fyzika)	prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (Fakulta prírodných vied UMB)	
prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (anorganická chémia)	prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (Prírodovedecká fakulta UK)	
prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (fyzika plazmy)		

3.6. Údaje o pedagogickej činnosti

Tabuľka 3g Prednášky a cvičenia vedené v roku 2017

PEDAGOGICKÁ ČINNOSŤ	Prednášky		Cvičenia a semináre	
	doma	v zahraničí	doma	v zahraničí
Počet prednášateľov alebo vedúcich cvičení	2	0	1	0
Celkový počet hodín v r. 2017	108	0	24	0

Prehľad prednášateľov predmetov a vedúcich cvičení, s uvedením názvu predmetu, úväzku, katedry, fakulty, univerzity/vysokej školy je uvedený v prílohe D.

Tabuľka 3h Aktivity pracovníkov na VŠ

1.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako vedúci alebo konzultanti diplomových a bakalárskych prác	3
2.	Počet vedených alebo konzultovaných diplomových a bakalárskych prác	3
3.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako školitelia doktorandov (PhD.)	0
4.	Počet školených doktorandov (aj pre iné inštitúcie)	0
5.	Počet oponovaných dizertačných a habilitačných prác	1
6.	Počet pracovníkov, ktorí oponovali dizertačné a habilitačné práce	1
7.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií pre obhajoby DrSc. prác	0
8.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií pre obhajoby PhD. prác	0
9.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií, resp. oponenti v inauguračnom alebo habilitačnom konaní na vysokých školách	0

3.7. Iné dôležité informácie k pedagogickej činnosti

4. Medzinárodná vedecká spolupráca

4.1. Medzinárodné vedecké podujatia

4.1.1. Medzinárodné vedecké podujatia, ktoré organizácia SAV organizovala v roku 2017 alebo sa na ich organizácii podieľala, s vyhodnotením vedeckého a spoločenského prínosu podujatia

4.1.2. Medzinárodné vedecké podujatia, ktoré usporiada organizácia SAV v roku 2018 (anglický a slovenský názov podujatia, miesto a termín konania, meno, telefónne číslo a e-mail zodpovedného pracovníka)

4.1.3. Počet pracovníkov v programových a organizačných výboroch medzinárodných konferencií

Tabuľka 4a Programové a organizačné výbory medzinárodných konferencií

Meno pracovníka	Programový	Organizačný	Programový i organizačný
Spolu			

4.2. Členstvo a funkcie v medzinárodných orgánoch

4.2.1. Členstvo a funkcie v medzinárodných vedeckých spoločnostiach, úniách a národných komitétach SR

prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.

International Academy for Quantum Molecular Sciences (funkcia: volené členstvo)

4.3. Účasť expertov na hodnotení medzinárodných projektov (EÚ RP, ESF a iných)

Tabuľka 4b Experti hodnotiaci medzinárodné projekty

Meno pracovníka	Typ programu/projektu/výzvy	Počet hodnotených projektov
Demovič Lukáš	ESFRI Roadmap 2018	1
Holka Filip	IT4I OPEN 10TH CALL	2
	IT4I OPEN 11TH CALL	3

4.4. Najvýznamnejšie prínosy MVTS ústavu vyplývajúce z mobility a riešenia medzinárodných projektov a iné informácie k medzinárodnej vedeckej spolupráci

Prehľad údajov o medzinárodnej mobilite pracovníkov organizácie je uvedený v Prílohe E.

Prehľad a údaje o medzinárodných projektoch sú uvedené v kapitole 2 a Prílohe B.

5. Vedná politika

6. Spolupráca s univerzitami/vysokými školami, štátnymi a neziskovými inštitúciami okrem aktivít uvedených v kap. 2, 3, 4

6.1. Spolupráca s univerzitami/VŠ (fakultami)

6.2. Významné aplikácie výsledkov výskumu v spoločenskej praxi alebo vyriešenie problému pre štátnu alebo neziskovú inštitúciu

6.3. Iná činnosť využiteľná pre potreby spoločenskej praxe

7. Spolupráca s aplikačnou a hospodárskou sférou okrem aktivít uvedených v kap. 2, 3, 4

7.1. Spoločné pracoviská s aplikačnou sférou

7.2. Kontraktový – zmluvný výskum (vrátane zahraničných kontraktov)

7.3. Iná činnosť využiteľná pre potreby hospodárskej praxe

8. Aktivity pre Národnú radu SR, vládu SR, ústredné orgány štátnej správy SR a iné organizácie

8.1. Členstvo v poradných zboroch vlády SR, Národnej rady SR, ministerstiev SR, orgánoch EÚ, EP, NATO a pod.

Tabuľka 8a Členstvo v poradných zboroch Národnej rady SR, vlády SR, ministerstiev SR, orgánoch EÚ, EP, NATO a pod.

Meno pracovníka	Názov orgánu	Funkcia
prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.	Rada PRACE - Partnership for Advanced Computing in Europe	Člen

8.2. Expertízna činnosť a iné služby pre štátnu správu a samosprávu

8.3. Členstvo v radách štátnych programov a podprogramov ŠPVV a ŠO

Tabuľka 8b Členstvo v radách štátnych programov a podprogramov ŠPVV a ŠO

Meno pracovníka	Názov orgánu	Funkcia
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.	Predstavenstvo SANET (Združenie používateľov Slovenskej akademickej dátovej siete)	Člen

8.4. Prehľad aktuálnych spoločenských problémov, ktoré riešilo pracovisko v spolupráci s Kanceláriou prezidenta SR, s vládnyimi a parlamentnými orgánmi alebo pre ich potrebu

9. Vedecko-organizačné a popularizačné aktivity

9.1. Vedecko-popularizačná činnosť

Tabuľka 9a Súhrnné počty vedecko-popularizačných činností organizácie SAV

Typ	Počet	Typ	Počet	Typ	Počet
prednášky/besedy	19	tlač	0	TV	1
rozhlas	1	internet	3	exkurzie	2
publikácie	0	multimediálne nosiče	0	dokumentárne filmy	0
iné	1				

9.2. Vedecko-organizačná činnosť

Tabuľka 9b Vedecko-organizačná činnosť

Názov podujatia	Domáca/ medzinárodná	Miesto	Dátum konania	Počet účastníkov
-----------------	-------------------------	--------	---------------	---------------------

9.3. Účasť na výstavách

Názov výstavy: Výstava počítačov - od počítača po smartfón

Miesto konania: Výpočtové stredisko SAV, Bratislava

Dátum: 2.10.2017

Zhodnotenie účasti: Výstavu navštívilo 185 návštevníkov, z toho 9 exkurzií, prevažne študenti stredných škôl. Mladí ľudia mali možnosť zoznámiť sa s rapídny vývojom informačných technológií pomocou názorných interaktívnych inštalácií.

9.4. Účasť v programových a organizačných výboroch národných konferencií

Tabuľka 9c Programové a organizačné výbory národných konferencií

Meno pracovníka	Programový	Organizačný	Programový i organizačný
Spolu			

9.5. Členstvo v redakčných radách časopisov

Mgr. Filip Holka, PhD.

HPC Focus (funkcia: Člen)

RNDr. Gabriela Obadalová

HPC Focus (funkcia: Člen)

doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD.

HPC Focus (funkcia: Člen)

MSc. Miloslav Valčo

HPC Focus (funkcia: Člen)

9.6. Činnosť v domácich vedeckých spoločnostiach

9.7. Iné dôležité informácie o vedecko-organizačných a popularizačných aktivitách

10. Činnosť knižnično-informačného pracoviska

10.1. Knižničný fond

Tabuľka 10a Knižničný fond

Knižničné jednotky spolu		
z toho	knihy a zviazané periodiká	
	audiovizuálne dokumenty	
	elektronické dokumenty (vrátane digitálnych)	
	mikroformy	
	iné špeciálne dokumenty - dizertácie, výskumné správy	
	Rukopisy, vzácne tlače	
Počet titulov dochádzajúcich periodík		
z toho zahraničné periodiká		
Ročný prírastok knižničných jednotiek		
v tom	kúpou	
	darom	
	výmenou	
	bezodplatným prevodom	
	náhradou	
Úbytky knižničných jednotiek		
Knižničné jednotky spracované automatizovane		

Výraz „v tom“ označuje úplné (vyčerpávajúce) údaje, ktorých súčet sa musí rovnať údaju v riadku „spolu“, čiže nadradenému riadku.

Výraz „z toho“ označuje neúplné (výberové) údaje, ktorých súčet sa nemusí rovnať údaju v riadku „spolu“.

10.2. Výpožičky a služby

Tabuľka 10b Výpožičky a služby

Výpožičky spolu (riadok 1)		
v tom z r. 1	prezenčné výpožičky	
	absenčné výpožičky	
v tom z r. 1	odborná literatúra pre dospelých	
	výpožičky periodík	
MVS iným knižniciam		
MVS z iných knižníc		
MMVS iným knižniciam		
MMVS z iných knižníc		
Počet vypracovaných bibliografií		
Počet vypracovaných rešerší		

10.3. Používatelia

Tabuľka 10c Používatelia

Registrovaní používatelia	
Návštevníci knižnice spolu (bez návštevníkov podujatí)	

10.4. Iné údaje

Tabuľka 10d Iné údaje

On-line katalóg knižnice na internete (1=áno, 0=nie)	
Náklady na nákup knižničného fondu v €	

10.5. Iné informácie o knižničnej činnosti

11. Aktivity v orgánoch SAV

11.1. Členstvo vo Výbore Snemu SAV

Ing. Michal Kadúć

- člen

11.2. Členstvo v Predsedníctve SAV a vo Vedeckej rade SAV

11.3. Členstvo vo vedeckých kolégiách SAV

prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.

- VK SAV pre chemické vedy (člen)

11.4. Členstvo v komisiách SAV

Mgr. Lukáš Demovič, PhD.

- Bytová komisia SAV (Člen)
- Komisia SAV pre informačné a komunikačné technológie (Tajomník)
- Komisia SAV pre infraštruktúru a štrukturálne fondy (Člen)

Pavol Herda

- Komisia SAV pre komunikáciu a médiá (člen)

Ing. Michal Kadúć

- Komisia SAV pre informačné a komunikačné technológie (člen)

11.5. Členstvo v orgánoch VEGA

12. Hospodárenie organizácie

12.1. Výdavky PO SAV

Tabuľka 12a Výdavky PO SAV (v €)

V ý d a v k y	Skutočnosť k 31.12.2017 spolu	v tom:			
		zo ŠR od zriaďovateľ a	z vlastných zdrojov	z iných zdrojov	z toho: ŠF EÚ
Výdavky spolu	1 183 607,84	1 057 015,00	62 000,42	64 592,42	
Bežné výdavky	1 137 407,49	1 015 841,00	56 974,07	64 592,42	
v tom:					
mzdy (610)	479 091,20	422 210,00	28 948,93	27 932,27	
poistné a príspevok do poisťovní (620)	168 842,41	149 116,00	9 000,63	10 725,78	
tovary a služby (630)	488 915,50	444 204,00	18 777,13	25 934,37	
z toho: časopisy	134,51	134,51			
VEGA projekty	4 706,00	4 706,00			
MVTS projekty					
CE					
vedecká výchova					
bežné transfery (640)	558,38	311,00	247,38		
z toho: štipendiá					
transfery partnerom projektov					
Kapitálové výdavky	46 200,35	41 174,00	5 026,35		
v tom:					
obstarávanie kapitálových aktív	46 200,35	41 174,00	5 026,35		
kapitálové transfery					
z toho: transfery partnerom projektov					

12.2. Príjmy PO SAV

Tabuľka 12b Príjmy PO SAV (v €)

P r í j m y	Skutočnosť k 31.12.2017 spolu	v tom:	
		rozpočtové	z mimoroz p. zdrojov

Príjmy spolu	1 226 640,19	1 079 782,69	146 857,50
Nedaňové príjmy	52 767,69	52 767,69	
v tom:			
príjmy z prenájmu			
príjmy z predaja výrobkov a služieb	52 562,69	52 562,69	
iné			
Granty a transfery (mimo zdroja 111)	146 857,50		146 857,50
v tom:			
tuzemské	522,00		522,00
z toho: APVV			
iné	146 305,50		146 305,50
zahraničné	146 305,50		146 305,50
z toho: projekty rámcového programu EÚ	146 305,50		146 305,50
iné			

13. Nadácie a fondy pri organizácii SAV

14. Iné významné činnosti organizácie SAV

Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku (SVDVT)

Rok 2017 bol z pohľadu SVDVT prelomový v tom, že Ing. Štefan Kohút ukončil činnosť ako vedúci a prešiel na pozíciu emeritného pracovníka. Vedúcim sa stal doc. Ing. Martin Šperka, PhD. Uskutočnila sa inventúra a evidencia vystavených zbierkových predmetov a predmetov v depozitári. V júni bola zbierka ocenená a odovzdaná ako celok do majetku VS SAV. Významným medzníkom bol deň 30.5.2017, keď bola rozhodnutím Slovenského národného múzea SVDVT zaregistrovaná do evidencie múzejných zariadení pod registračným číslom ZMP/4/2017. Ďalšou dôležitou udalosťou bolo podpísanie Zmluvy o vytvorení združenia Slovenské distribuované múzeum počítačov (SDMP) spolu so zakladajúcimi členmi a vznik prvej verzie stránky tohto združenia (<http://sdmp.sav.sk>).

V roku 2017 sme získali množstvo nových predmetov – počítačov, ich častí, súčiastok, ako aj historických písomných dokumentov. Od inventúry v marci 2017 je to približne 100 predmetov, ktoré sú zdokumentované alebo sa ešte dokumentujú, sú vystavené alebo sa pripravuje ich inštalácia. Proces dokumentovania hlavne zložitejších exponátov je náročný, nakoľko je treba robiť výskum systémov, ale aj ich modulov, ich histórie a zisťovať informácie o výrobcoch, technických parametroch, majiteľoch a aplikáciách. Realizovalo sa niekoľko interaktívnych predmetov a inštalácií názorne ilustrujúcich vývoj jednotlivých subsystémov počítačov. Na internetovej stránke SVDVT <http://www.vystava.sav.sk> pribudlo 17 príspevkov v rubrike „Pohľady do histórie“ – spomienky pamätníkov vývoja, výroby a aplikácií výpočtovej techniky v minulosti a doplnili sa rubriky jednotlivých tematických celkov. V roku 2017 navštívilo výstavu celkovo 556 návštevníkov, z toho 10 bolo cudzincov (Česká republika 2, Nórsko 1, NSR 1, Rakúsko 2, Rusko 2, Španielsko 1, Veľká Británia 1).

Počítačová sieť

IPv6 (Internet Protocol version 6)

Na začiatku roka 2014 bol vypracovaný zoznam adries IPv6 pre jednotlivé ústavy SAV. Vo februári bola spustená prevádzka IPv6 v testovacom režime na VS SAV. Počas testovania sa nevyskytli žiadne závažné problémy a od mája 2014 je protokol IPv6 dostupný aj pre ostatné ústavy SAV. Reálne využívanie IPv6 ústavmi SAV však začalo až v tomto roku, kedy sme evidovali prvú žiadosť o pridelenie adresného rozsahu. VS SAV vykonalo potrebné konfiguračné úpravy na sieťovom rozvážači a zaslalo nastavenia konkrétnemu ústavu.

Incidenty na počítačovej sieti

Ani rok 2017 sa nezaobišiel bez väčších či menších incidentov na lokálnych počítačových sieťach niektorých ústavov. Jednalo sa najmä o napadnutie nezabezpečených alebo zle zabezpečených sieťových zariadení (počítače, servery,...), ktoré potom generovali nevyžiadanú komunikáciu a napádali iné zariadenia. Odbor počítačovej siete VS SAV v týchto prípadoch pomáhal s analýzou siete a hľadaním napadnutých systémov na vnútorných počítačových sieťach jednotlivých ústavov. Vo februári 2017 došlo k poškodeniu uchytenia UBUNTU loco 5 zariadení v Piešťanoch na budove ON Semiconductors. VS SAV zabezpečilo opravu tohto rádiového spojenia a sfunkčnilo pripojenie. V tom istom mesiaci došlo k napadnutiu týchto zariadení zo strany hackerov. VS SAV túto hrozbu zastavilo a zabezpečilo zariadenia proti ďalším útokom. V Októbri 2017 došlo k poškodeniu optického kábla, ktoré zabezpečuje pripojenie Ústavu Zoológie z dôvodu silného vetra. VS SAV vykonalo nápravu a upevnilo optický kábel.

Prevádzka siete na Patrónke

Vo februári došlo k pripojeniu Ústavu biochémie a genetiky živočíchov SAV v areáli Patrónky. Zabezpečili sme optické pripojenie, zmenu technických parametrov siete a sfunkčnili sme pripojenie ústavu. V roku 2017 bola vykonaná veľká údržba zariadení sieťového rozvádzača. Došlo k výmene batérií a výmene ventilátorov v záložných napájacích zdrojoch. Naďalej zabezpečujeme 24hodinový monitoring zelených hraníc na jednotlivých ústavoch (hlavný informačný rozvádzač v budove) a v spojení s rýchlym servisným zásahom sa snažíme doby výpadku minimalizovať na najnižšiu možnú mieru.

Centrálne poskytované služby

Mailový systém

Hlavnou úlohou odboru sieťových služieb je prevádzka centrálnych mailových služieb. Tieto sú prevádzkované na viacerých serveroch vo virtualizačnom prostredí VMware v Bratislave s využitím mailového systému Zimbra. V súčasnosti je na centrálnych mailových serveroch prevádzkovaných vyše 3500 používateľských mailových schránok.

Tak ako po minulé roky aj v roku 2017 sme zaznamenali veľké množstvo nevyžiadanej pošty so žiadosťami o zaslanie prihlasovacích údajov k používateľským kontám, prípadne vyplnenie rôznych formulárov na stránka, ktoré takéto údaje zbierali. Našlo sa zopár používateľov, ktorí na takéto výzvy zareagovali a ich kontá boli zneužitá na rozposielanie nevyžiadanej pošty. Snažili sme sa promptne reagovať a blokovat' všetky prichádzajúce aj odchádzajúce maily podobného typu. Keďže sa nepodarilo zablockovať všetky nevyžiadané maily, dochádzalo k výskytu našich mailových serverov na blacklistoch, čo spôsobovalo problémy s doručovaním mailov mimo SAV. Počas roka sme začali prevádzkovať ďalšie servery, ktoré majú zlepšiť možnosti boja proti nevyžiadanej pošte. V najbližšom období je naplánovaný upgrade centrálného mailového systému Zimbra, ktorý obsahuje aj vylepšený antispamový filter.

Poskytovanie virtuálnych serverov pre organizácie SAV

Vo Výpočtovom stredisku SAV je prevádzkované virtualizačné prostredie VMware, ktoré umožňuje poskytovanie centrálnych zdrojov organizáciám SAV formou virtuálnych serverov. V súčasnosti sú prevádzkované viaceré servery, ktoré slúžia hlavne na zálohovanie vedeckých dát, ale aj ako testovacie prostredie. V roku 2017 sme vymenili optické prepínače za rýchlejšie a tým sme zefektívniili prístupy serverov k dátam umiestnených na diskovom poli. Virtualizačné prostredie pozostáva zo 6 serverov, z ktorých 4 sú umiestnené v Bratislave a 2 záložné servery sú prevádzkované na detašovanom pracovisku v Žiline. Jednotlivé prostredia sú navzájom prepojené pomocou zabezpečeného prepojenia s rýchlosťou viac ako 100Mbit/s.

IP telefónia

Tak ako po iné roky aj v roku 2017 sme zabezpečovali poskytovanie telefónnej služby na báze IP telefónie pre vybrané ústavy SAV. Využívali sme na to systém OVS v.5.0. zakúpený ešte v roku 2012. Ku dňu 31.12.2017 sme ukončili využívanie SLA k tomuto systému na základe zmluvy č. H/12/0090 o údržbe komunikačného zariadenia OpenScape Voice, uzavretej so spoločnosťou Ixperta s.r.o. Pre prevádzku boli použité virtuálne servery v prostredí VMware, prevádzkované v priestoroch VS.

V priebehu roka sme riešili len niekoľko drobných bezpečnostných incidentov a technických porúch. Prevádzka bola počas roka stabilná a bezproblémová. Urobili sme analýzu možných riešení pre nahradenie doterajšieho systému za novší z dôvodu morálneho zastarania systému. Predpokladáme, že k realizácii tohto zámeru dôjde v priebehu roka 2018. V priebehu roka sme rozšírili rozsah poskytovaných služieb a pripojili k ústredni ďalší ústav, konkrétne Ústav biochémie a genetiky živočíchov SAV a Ústav hydrológie SAV. Naďalej sme vypomáhali konzultáciami pre ústavy, ktoré zvažujú pripojiť sa k systému IP telefónie.

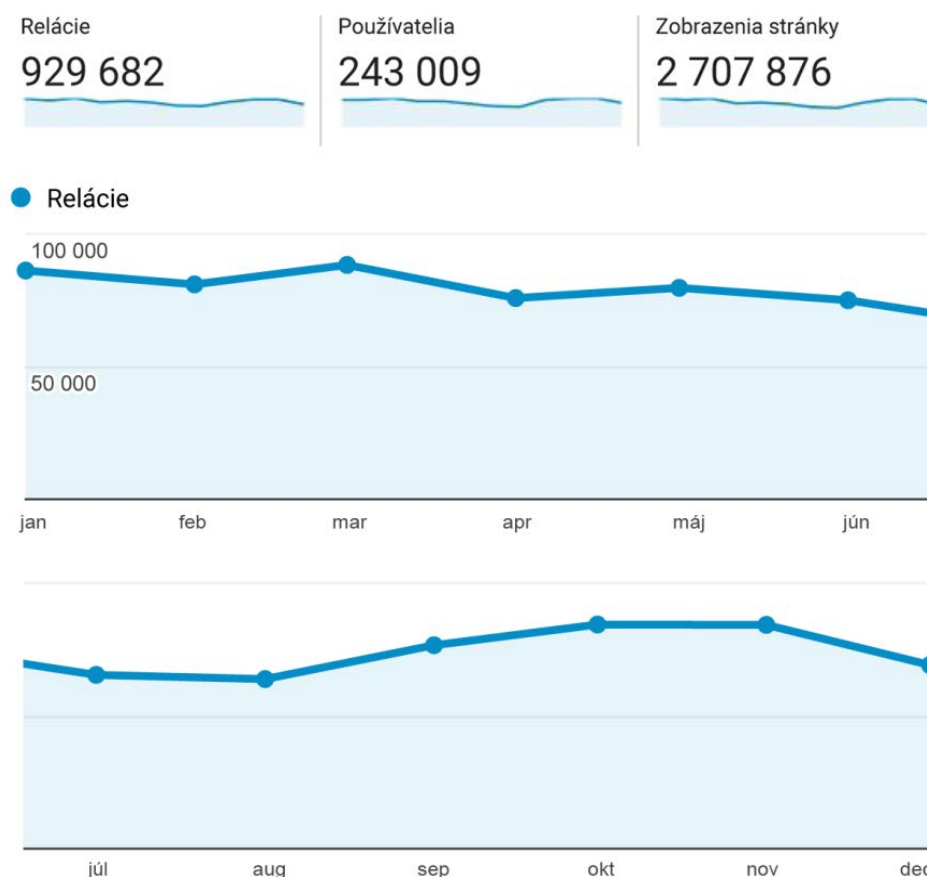
Videokonferencie

Počas celého roka sme mali k dispozícii platformu Cisco Telepresence z národného projektu „Národná teleprezentačná infraštruktúra pre podporu výskumu, vývoja a transferu technológií“. V priestoroch Výpočtového strediska SAV sú nainštalované dva koncové body systému. Jeden - označený ako TELE-042 je určený pre 10 osôb a je umiestnený v učebni (miestnosť č.2) a druhý označený ako TELE-168 je určený pre individuálneho účastníka a je inštalovaný v knižnici (miestnosť č.3). V tomto roku sme vypomáhali pri organizovaní videokonferencie pre akciu EXTRAPOLÁCIE 2017, organizovanej Ústavom informatiky a Výpočtovým strediskom SAV.

Informačné systémy

WEBSAV

Webový portál SAV prešiel v roku 2017 zmenou prispôsobenia dizajnu podľa princípov UX/UI (používateľská skúsenosť), s ohľadom na moderný responzívny dizajn. Optimalizovala sa rýchlosť načítavania stránok a zobrazenia webovej stránky na rôznych druhoch mobilných zariadení za pomoci štatistík z analytického nástroja. Za rok 2017 bolo naplnených 6 elektronických vydaní Správ SAV. Naplnenie zahŕňalo konverziu PDF do on-line prehliadača, úpravu obrázkov/animácií a textov do nových čísiel a grafické zmeny portálu pri zmene loga Správ SAV. V roku 2017 boli v systéme WEBSAV uskutočnené programátorské zmeny na základe zlučovania organizácii SAV (obsahujúce migráciu databáz ELVYS dotknutých organizácií SAV). Ďalej boli vytvorené exporty projektov pre OVV SAV, exporty z databázy doktorandov a ďalšie. Podľa štatistík návštevnosti portálu SAV je vidieť, že celkový počet relácií za rok 2017 presiahol 929 tisíc (priemerne vyše 77 tisíc návštev mesačne) a počet unikátnych používateľov prekročil 243 tisíc (Obrázok č. 1).



Obrázok č. 1

V návštevnosti podľa krajín je Slovensko zastúpené v takmer 89% prípadov, nasleduje Česká republika so skoro 3%-ným podielom návštevnosti. Ďalšie krajiny majú podiel pohybujúci sa pri jednom percente návštevnosti (Obrázok č. 2).

Krajina		Relácie
		929 682
1.	Slovakia	823 886 (88,62 %)
2.	Czechia	26 034 (2,80 %)
3.	United States	9 352 (1,01 %)
4.	Germany	7 352 (0,79 %)
5.	France	4 949 (0,53 %)
6.	Austria	4 756 (0,51 %)
7.	United Kingdom	3 918 (0,42 %)
8.	Russia	3 813 (0,41 %)
9.	Poland	3 788 (0,41 %)
10.	India	3 627 (0,39 %)

Obrázok č. 2

ELVYS

V systéme ELVYS (Elektronická výročná správa organizácie) boli v roku 2017 realizované programátorské zmeny v databázach podľa požiadaviek členov P SAV a skúseností od pracovníkov SAV pri spracovávaní výročných správ. Zabezpečovali sme zálohovanie a údržbu databáz ELVYS, pripravili a spracovali osnovu Výročnej správy pre rok 2017 podľa požiadaviek. Počas celého roka sme pre systém ELVYS poskytovali hot-line podporu pre všetkých pracovníkov SAV. Uskutočnili sme viacero školení a konzultácií.

Ďalšie aktivity

Z bezpečnostných dôvodov a kvôli ochrane uložených údajov bola nutná reinštalácia centrálného web servera organizácií SAV do nového operačného systému. Reinštalácia zahŕňala konfiguráciu, migráciu a testovanie, ako aj nové verzie PHP a MySQL. Z tohto dôvodu bola zabezpečená technická podpora organizáciám SAV so spustením ich web stránok v novom prostredí. V prvej polovici roka 2017 VS SAV vytvorilo portál Otvorená akadémia, ktorého poslaním je prispievať k rozvoju spoločnosti vedeckým výskumom, zameraným na riešenie problémov a tém. V roku 2017 OIS udržiaval aktuálne údaje na webovom portáli KC Smolenice SAV a bezodplatne bola zabezpečená aktuálnosť on-line jedálneho lístka v stravovacom zariadení na bratislavskej Patrónke.

Prevádzka HPC techniky

Správa a monitorovanie HPC systémov

Počas roka prebiehal štandardný monitoring a servis HPC zariadení a príslušnej infraštruktúry vo VS SAV v Bratislave a na detašovanom pracovisku v Žiline. Na superpočítači Aurel bolo okrem 2 preventívnych kontrol vykonaných 7 hardvérových servisných zásahov s externou účasťou pracovníka IBM a výmenou komponentov (interného diskového poľa, zdrojov napájania a optického subsystému). Okrem toho boli potrebné ďalšie zásahy na externom diskovom poli a systéme záložných zdrojov diskového poľa (náhradné diely boli zakúpené z interných zdrojov VS SAV). V rámci platenej technickej podpory bolo riešených niekoľko požiadaviek súvisiacich s paralelným súborovým systémom, medziuzylovou komunikáciou a problémami na úrovni operačného systému. Na výpočtovom klastri v Žiline bol vymenený jeden z procesorov.

Monitorovanie HPC systémov prebiehalo v štandardnom režime. Monitorovací systém bol v priebehu roka aktualizovaný a rozšírený o ďalšie moduly.

Chladiaci systém v Bratislave si v roku 2017 vyžiadala 11 servisných zásahov, pričom jedna z porúch viedla k narušeniu prevádzky superpočítača. Taktiež boli na oboch kompresoroch vymenené komunikačné karty.

Koncom roka 2017 prešiel pod správu VS SAV výpočtový klastor zaobstaraný v rámci projektu SIVVP na Ústave experimentálnej fyziky SAV v Košiciach. Ten je momentálne v servisnej odstávke (prebieha komplexná reinstalácia a rekonfigurácia) a jeho plánované spustenie je koniec januára 2018.

Nedostupnosť HPC systémov

V dôsledku plánovanej údržby ako aj nepredvídaných udalostí boli HPC systémy v správe Výpočtového strediska SAV počas roka 2017 sporadicky nedostupné (viď tabuľka 1). Červenou farbou sú označené udalosti, kedy došlo k nedostupnosti systému z dôvodu poruchy alebo nepredvídaných udalostí.

Tabuľka 1: Nedostupnosť HPC systémov za rok 2017

Začiatok	Koniec	Dôvod	Lokalita
6. 4. 2017	7. 4. 2017	Zlyhanie chladiaceho zariadenia	Bratislava
29. 4. 2017	3. 5. 2017	Plánovaná odstávka distribúcie elektrickej energie z dôvodu nevyhnutných prác na trafostanici č. 197	Bratislava
1. 8. 2017	4. 8. 2017	Aktualizácie firmvéru a OS	Bratislava
2. 11. 2017	6. 11. 2017	Porucha jedného zo servisných nódov (časť superpočítača dostupná od 2. 11. 2017)	Bratislava
28. 12. 2017	28. 12. 2017	Výpadok elektrickej energie	Bratislava

Evidencia používateľov

Registrácia a evidencia používateľov prebieha prostredníctvom portálu SIVVP, ktorý je v našej správe. V priebehu roka 2017 pribudlo 24 nových používateľov. Celkový počet aktuálne registrovaných používateľov je 194, zo 48 akademických a vedeckých pracovísk. Najviac používateľov je z Prírodovedeckej fakulty UK (45), nasleduje Ústav anorganickej chémie SAV (20), Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK (18) a Fyzikálny ústav SAV (11).

Evidencia projektov

V roku 2017 prešlo schvaľovacím procesom Projektového výboru pre HPC 8 nových projektov (viď tabuľka 2). Spolu s pokračujúcimi projektami je na portáli SIVVP registrovaných úhrne 24 aktívnych projektov.

Tabuľka 2: Zoznam nových projektov za rok 2017

Názov projektu	Zodp. riešiteľ	Pracovisko
Senzitizéry na báze benzotiazolu a tiazol-kondenzovaných heterocyklov pre fotovoltaičné aplikácie	Peter Hrobárik	PRIF UK
Elektrónová štruktúra organo-metalických komplexov a	Vladimír Sládek	CHÚ SAV

malých molekúl s heteroatómami		
Vlastnosti a katalytická účinnosť chirálnych metalocénov	Radovan Šebesta	PRIF UK
Funkcionalizácia ťlových minerálov netradičnými organickými surfaktantmi	Peter Škorňa	ÚACH SAV
Advanced Superconducting Motor Experimental Demonstrator	Enric Pardo	EÚ SAV
Transboundary ecological connectivity – modelling landscapes and ecological flows	Robert Pazúr	GÚ SAV
Noncovalent Interactions by 1-Determinant Fixed-Node Diffusion Monte Carlo	Matúš Dubecký	MTF STU
Modelovanie rýchleho chladenia komplexných kovových zliatin	Ján Škoviera	FÚ SAV

Evidencia výstupov

Na registračnom portáli evidujeme za rok 2017 sedemnást' nových výstupov (publikácií) z projektov (celkovo je ich už 89). Ich úplný zoznam je dostupný cez odkaz:

<http://www.vs.sav.sk/?section=departments&sub=vvt&sub2=publications>

Štatistiky využívania

Na stránke Výpočtového strediska sú tiež uvedené (a pravidelne v mesačných intervaloch aktualizované) štatistiky využívania superpočítača Aurel:

<http://www.vs.sav.sk/?section=departments&sub=vvt&sub2=stat>

V tabuľke 3 je uvedený ročný sumár spotreby strojového času pre jednotlivé pracoviská.

Tabuľka 3: Spotrebovaný strojový čas za rok 2017 na pracovisko

Pracovisko	Spotrebovaný stroj. čas (tisícny CPUhodín)
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK	3411
Prírodovedecká fakulta UK	3341
Fyzikálny ústav SAV	2828
Materiálovotechnologická fakulta STU	2432
Geofyzikálny ústav SAV	263
Neuroimunologický ústav SAV	143
Ústav anorganickej chémie SAV	21
Výpočtové stredisko SAV	8

Používateľská podpora

Komunikácia s používateľmi je vedená prioritne prostredníctvom elektronického tiketového systému (spustený bol na jar 2016). V roku 2017 je v ňom evidovaných 23 uzatvorených tiketov a niekoľko rozpracovaných. Veľká časť komunikácie však stále prebieha cez mail, prostredníctvom oficiálnej adresy používateľskej podpory (hpcsupport@savba.sk) alebo cez mailové adresy jednotlivých zamestnancov VS SAV. K používateľskému aplikačnému vybaveniu pribudlo 5 nových aplikácií (3 na superpočítači a 2 na výpočtovom klastri v Žiline).

V marci 2017 sa uskutočnilo stretnutie s používateľmi a prebehla diskusia o zmene pravidiel dávkovacieho subsystému na superpočítači, ktoré boli následne implementované.

Iné aktivity

VS SAV sa zapojilo do letného edukačného programu PRACE Summer of HPC, v rámci ktorého riešia vybraní študenti projekty priamo vo významných európskych HPC strediskách. Dvaja študenti zo Španielska a Veľkej Británie na našom pracovisku riešili vedecké projekty pod vedením Prof. J. Nogu a Doc. M. Pitoňáka.

VS SAV participovalo na verejnom podujatí "Noc výskumníka", kde prezentovalo možnosti využívania HPC systémov (okrem vlastných aj systémov združených v európskej platforme

PRACE).

V rámci akcie “Týždeň vedy a techniky na SAV” bol pripravený cyklus prednášok pri príležitosti 5. výročia spustenia superpočítača Aurel.

IT školenia

V roku 2017 sme po prieskume záujmu medzi zamestnancami SAV koncom roka spustili školenia z viacerých oblastí informačných technológií, ktoré organizačne aj personálne zabezpečujú zamestnanci VS SAV. Zoznam poskytnutých školení spolu s počtami účastníkov sa nachádza v nasledovnej tabuľke.

Názov školenia	Počet účastníkov
MS Word	9
MS Excel	10
MS Powerpoint	10
C/C++ začiatocníci	9
C/C++ pokročilí	6
Myšlienkové mapy	14
Photoshop	17
Linux začiatocníci	19

Časopis HPC Focus

Vychádza raz ročne a slúži na propagáciu HPC na Slovensku, čitatelia ho majú k dispozícii zadarmo buď v tlačenej forme alebo na webovej stránke https://vs.sav.sk/?section=materials&sub=magazine_list V tomto roku sme dokončili a vydali číslo z roku 2016, ktoré bolo venované 40. výročiu vzniku Výpočtového strediska SAV. Regulárne vydanie pre rok 2017 sme pripravili k príležitosti dňa otvorených dverí v rámci Týždňa vedy a techniky a online verzia vyšla po prvýkrát aj v angličtine.

Po minulé roky býval vznik každého čísla poznačený istou laxnosťou a nekoordinovanosťou (čo sa prejavilo aj na meškaní ročníka 2016), preto sme vytvorili redakčnú radu HPC Focusu, ktorá bude dohliadať na jeho obsahovú a starať sa o včasné napĺňanie jeho obsahu.

15. Vyznamenania, ocenenia a ceny udelené pracovníkom organizácie v roku 2017

15.1. Domáce ocenenia

15.1.1. Ocenenia SAV

Noga Jozef

Ocenenie Presedníctva Slovenskej akadémie vied

Oceňovateľ: P SAV

Opis: Za vedeckú publikáciu s mimoriadne veľkým počtom citácií

15.1.2. Iné domáce ocenenia

Kohút Štefan

Propagátor vedy a techniky za rok 2017

Oceňovateľ: Zväz slovenských vedeckotechnických spoločností

15.2. Medzinárodné ocenenia

16. Poskytovanie informácií v súlade so zákonom č. 211/2000 Z. z. o slobodnom prístupe k informáciám v znení neskorších predpisov (Zákon o slobode informácií)

17. Problémy a podnety pre činnosť SAV

Z pohľadu VS SAV by bolo vhodné, keby ústavy SAV viac kooperovali a koordinovali svoje investície do IT infraštruktúry. Jedným z riešení ako dosiahnuť tento stav by mohlo byť posilnenie postavenia Komisie pre IT, ktorá by mohla operovať s väčším rozpočtom (na úkor samotných ústavov). Jedná sa pochopiteľne iba o investície do serverov, HPC zariadení a významných softvérových riešení - tieto sú zväčša veľmi vhodné na spoločné využívanie, preto je škoda, aby sa prostriedky použiteľné pre výskumné aktivity míňali na redundantnú infraštruktúru.

Ďalšou možnosťou na zlepšenie aktuálneho stavu je väčšia koordinácia medzi VS SAV a OIKT ÚSAV tak, aby sa predišlo napr. nekonceptným zásahom do siete na Patrónke, predpokladáme však, že je to vec, ktorá sa vďaka prebiehajúcej transformácii SAV významne pohne dopredu.

Správu o činnosti organizácie SAV spracoval(i):

Mgr. Lukáš Demovič, PhD., 02/ 3229 3112

Ing. Michal Kadúč, 02/ 3229 3115

Mgr. Štefánia Mučíčková, 02/ 3229 3111

Riaditeľ organizácie SAV

.....
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.

Prílohy

Príloha A

Zoznam zamestnancov a doktorandov organizácie k 31.12.2017

Zoznam zamestnancov podľa štruktúry (nadväzne na údaje v Tabuľke 1a)

	Meno s titulmi	Úväzok (v %)	Ročný prepočítaný úväzok
Vedúci vedeckí pracovníci DrSc.			
1.	prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.	40	0.40
2.	prof. Ing. Ivan Plander, DrSc.	32	0.32
Samostatní vedeckí pracovníci			
1.	doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD.	50	0.50
Vedeckí pracovníci			
1.	Mgr. Lukáš Demovič, PhD.	100	1.00
2.	Mgr. Jozef Federič, PhD.	100	1.00
3.	Mgr. Filip Holka, PhD.	100	0.80
Odborní pracovníci s VŠ vzdelaním (ostatní zamestnanci)			
1.	Ing. Tomáš Hlaváč	56	0.56
2.	Ing. Margita Juhanesovičová	32	0.21
3.	Ing. Michal Kadúc	100	1.00
4.	Mgr. Anna Kavická	100	1.00
5.	Ing. Imrich Lenharčík	100	1.00
6.	Ing. Iveta Magulová	32	0.32
7.	Mgr. Štefánia Mučičková	100	1.00
8.	Ing. Pavol Novák	100	1.00
9.	RNDr. Gabriela Obadalová	100	1.00
10.	Ing. Monika Opálová	100	1.00
11.	Mgr. Matej Orság	100	1.00
12.	RNDr. Anton Pevala, CSc.	32	0.32
13.	Jaromír Suchánek, PhD.	100	1.00
14.	doc. Ing. Martin Šperka, PhD.	56	0.28
15.	Ing. Jozef Šurka	100	0.75
16.	MSc. Miloslav Valčo	100	1.00
17.	RNDr. Ľubomír Valenčík, CSc.	100	1.00
18.	Ing. Viktor Valentíny	100	1.00
19.	Bc. Blažej Vučkovski	100	1.00

Odborní pracovníci ÚSV			
1.	Pavol Herda	100	1.00
2.	Peter Jančár	100	1.00
3.	Peter Lukáč	100	1.00
4.	Martin Matúš	100	1.00
5.	Iveta Ruotolo	100	1.00
Ostatní pracovníci			
1.	Iveta Bouadjenak	32	0.32
2.	Anna Jurová	32	0.32

Zoznam zamestnancov, ktorí odišli v priebehu roka

	Meno s titulmi	Dátum odchodu	Ročný prepočítaný úväzok
Odborní pracovníci s VŠ vzdelaním (ostatní zamestnanci)			
1.	Ing. Štefan Kohút	30.6.2017	0.28
2.	Mgr. Dominika Mihálová	31.5.2017	0.42

Zoznam doktorandov

	Meno s titulmi	Škola/fakulta	Študijný odbor
Interní doktorandi hrazení z prostriedkov SAV			
<i>organizácia nemá interných doktorandov hrazených z prostriedkov SAV</i>			
Interní doktorandi hrazení z iných zdrojov			
<i>organizácia nemá interných doktorandov hrazených z iných zdrojov</i>			
Externí doktorandi			
<i>organizácia nemá externých doktorandov</i>			

Zoznam zamestnancov prijatých do jedného roka od získania PhD.

	Meno s titulmi	Dátum obhajoby	Dátum prijatia	Úväzok (v %)
--	-----------------------	-----------------------	-----------------------	---------------------

Zoznam emeritných vedeckých zamestnancov

	Meno s titulmi
1.	Ing. Štefan Kohút

Príloha B

Projekty riešené v organizácii

Medzinárodné projekty

Programy: Horizont 2020

1.) 5. implementačná fáza PRACE (*PRACE Fifth Implementation Phase (PRACE-5IP) project*)

Zodpovedný riešiteľ:	Jozef Noga
Trvanie projektu:	1.1.2017 / 30.4.2019
Evidenčné číslo projektu:	EC GA 730913
Organizácia je koordinátorom projektu:	nie
Koordinátor:	FORSCHUNGSZENTRUM JULICH GMBH
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	27 - Belgicko: 2, Bulharsko: 1, Cyprus: 1, Česko: 1, Nemecko: 2, Dánsko: 1, Španielsko: 1, Fínsko: 1, Francúzsko: 1, Veľká Británia: 1, Grécko: 1, Maďarsko: 1, Švajčiarsko: 1, Írsko: 2, Izrael: 1, Taliansko: 1, Holandsko: 1, Nórsko: 1, Poľsko: 1, Portugalsko: 1, Slovensko: 1, Slovinsko: 1, Švédsko: 1, Turecko: 1
Čerpané financie:	Horizont 2020: 23586 €

Dosiahnuté výsledky:

VS SAV je zapojené do aktivít zameraných na propagáciu PRACE, tréning, podporu operačných služieb, ako aj do vývoja a podpory paralelných algoritmov. Z najvýznamnejších výsledkov spomeňme hostovanie/mentorovanie dvoch zahraničných študentov v rámci programu PRACE Summer of HPC, podanie úspešných projektov na usporiadanie PRACE Seasonal School a na integráciu "big data" nástrojov do kvantovochemického balíka Molcas.

2.) PRACE - Štvrtá fáza implementácie projektu (*PRACE - Fourth Implementation Phase Project*)

Zodpovedný riešiteľ:	Jozef Noga
Trvanie projektu:	1.2.2015 / 30.4.2017
Evidenčné číslo projektu:	653838
Organizácia je koordinátorom projektu:	nie
Koordinátor:	Forschungszentrum Jülich GmbH
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	24 - Rakúsko: 1, Belgicko: 1, Bulharsko: 1, Cyprus: 1, Česko: 1, Nemecko: 1, Dánsko: 1, Španielsko: 1, Fínsko: 1, Francúzsko: 1, Veľká Británia: 1, Grécko: 1, Maďarsko: 1, Švajčiarsko: 1, Írsko: 2, Izrael: 1, Taliansko: 1, Holandsko: 1, Nórsko: 1, Poľsko: 1, Portugalsko: 1, Slovinsko: 1, Švédsko: 1
Čerpané financie:	Horizont 2020: 34794 €

Dosiahnuté výsledky:

V tomto roku sa VS SAV zapojilo do aktivity zameranej na podporu služieb poskytovaných v rámci Európskeho HPC ekosystému. Uskutočnili sa tiež kroky smerujúce k integrovaniu superpočítača Aurel do siete superpočítačov prevádzkovaných ostatnými krajinami združenými v PRACE.

Projekty národných agentúr

Programy: VEGA

1.) Presný a výpočtovo efektívny kvantovo chemický popis nekovalentných interakcií

(Accurate and computationally efficient quantum chemical description of non-covalent interactions)

Zodpovedný riešiteľ: Lukáš Demovič
Trvanie projektu: 1.1.2014 / 31.12.2017
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je koordinátorom projektu: nie
Koordinátor: Prírodovedecká fakulta UK, Bratislava
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Slovensko: 1
Čerpané financie: VEGA SAV: 4706 €

Dosiahnuté výsledky:

Publikácia "[Ni(bpy)(mal)(H₂O)]₃ H₂O and [Ni(4,4'-dmbpy)(mal)(H₂O)]₃ 1.5H₂O: syntheses, crystal structures, magnetic properties, and computational study of stacking interactions, J. Coord. Chem. 70(17) (2017) 2999-3018.. A. Uhrinová, J. Kuchár, A. Orendáčová, M. Pitoňák, J. Federič, J. Noga, J. Černák" sumarizuje teoretické a experimentálne štúdium komplexov nikel – bipyridín. Príspevkom našej skupiny boli "benchmark" výpočty interakčných energií zjednodušených modelov študovaných komplexov metódou škálovaného tretieho poriadku poruchovej teórie, ktoré slúžia ako podklad k výpočtom metódou funkcionálu hustoty, DFT.

Programy: Štrukturálne fondy EÚ Výskum a vývoj

2.) Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie - Konvergenca

(The Slovak Infrastructure for High Performance Computing - Convergence)

Zodpovedný riešiteľ: Lukáš Demovič
Trvanie projektu: 15.1.2010 /
Evidenčné číslo projektu: OPVaV/NP/1/2010, ITMS 26210120002
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 4 - Slovensko: 4
Čerpané financie: -

Dosiahnuté výsledky:

Projekt SIVVP sa nechádza v päťročnom monitorovacom období. V tomto roku sme nezaznamenali žiadne výrazné problémy s prevádzkou HPC zariadení vybudovaných v rámci tohto projektu. Používateľská základňa sa stabilne rozširuje, čo sa odzrkadľuje aj na vysokej vyťaženosť prevádzkovaných systémov. Z tohto hľadiska je teda projekt úspešný a určite má zmysel na ňom dlhodobo budovať rozvoj HPC technológií v SR. Aj preto sa v spolupráci s partnermi pokúšame komunikovať tieto fakty smerom k decíznej sfére, aby sa nestalo, že po skončení monitorovacieho obdobia projektu SIVVP tu neostane žiadna HPC infraštruktúra na zodpovednej úrovni, prístupná pre širokú akademickú obec.

3.) Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie – Regionálna

konkurencieschopnosť a zamestnanosť (The Slovak Infrastructure for High Performance Computing - Regional Competitiveness and Employment)

Zodpovedný riešiteľ: Lukáš Demovič
Trvanie projektu: 15.1.2010 /
Evidenčné číslo projektu: OPVaV/NP/2/2010, ITMS 26230120002
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Čerpané financie: -

Dosiahnuté výsledky:

Projekt SIVVP sa nechádza v päťročnom monitorovacom období. V tomto roku sme nezaznamenali žiadne výrazné problémy s prevádzkou HPC zariadení vybudovaných v rámci tohto projektu. Používateľská základňa sa stabilne rozširuje, čo sa odzrkadľuje aj na vysokej vyťažnosti prevádzkovaných systémov. Z tohto hľadiska je teda projekt úspešný a určite má zmysel na ňom dlhodobo budovať rozvoj HPC technológií v SR. Aj preto sa v spolupráci s partnermi pokúšame komunikovať tieto fakty smerom k decíznej sfére, aby sa nestalo, že po skončení monitorovacieho obdobia projektu SIVVP tu neostane žiadna HPC infraštruktúra na zodpovednej úrovni, prístupná pre širokú akademickú obec.

Programy: Vnútroústavné

4.) ELVYS (ELVYS)

Zodpovedný riešiteľ: Pavol Herda
Trvanie projektu: 1.1.2013 /
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 0
Čerpané financie: Úrad SAV: 2000 €

Dosiahnuté výsledky:

V systéme boli v roku 2017 uskutočnené zmeny na základe zlučovania organizácii SAV (migrácia databáz ELVYS dotknutých organizácií, programátorské zmeny v systéme). Zapracovaná bola nová osnova VYS podľa požiadaviek P SAV. Počas roka prebiehala hot-line podpora pre všetkých pracovníkov SAV. Uskutočnilo sa viacero školení a konzultácií v organizáciách SAV.

5.) WEBSAV (WEBSAV)

Zodpovedný riešiteľ: Pavol Herda
Trvanie projektu: 1.1.2013 /
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 0
Čerpané financie: Úrad SAV: 6000 €

Dosiahnuté výsledky:

Hlavnou zmenou na portáli WEBSAV bolo prispôsobenie grafického rozloženia pre mobilné zariadenia tzv. responzívny dizajn. Počas roka sa uskutočnilo množstvo programátorských zmien, či už súvisiacich so zlučováním organizácii SAV, alebo z pohľadu bezpečnosti. Pre rok 2017 sme zabezpečili naplnenie elektronických vydaní Správ SAV, zahŕňajúce konverziu PDF do on-line prehliadača, úpravu obrázkov/animácií a textov do nových čísiel.

6.) Inovácia diskového poľa (*Disk storage innovation*)

Zodpovedný riešiteľ:	Michal Kadúč
Trvanie projektu:	1.1.2017 / 31.12.2017
Evidenčné číslo projektu:	
Organizácia je koordinátorom projektu:	áno
Koordinátor:	Výpočtové stredisko SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	0
Čerpané financie:	Úrad SAV: 20000 €

Dosiahnuté výsledky:

V rámci projektu boli zakúpené dve nové diskové polia. Jedno diskové pole bude slúžiť pre uchovávanie dát prevádzkovaných virtuálnych serverov a na druhom diskovom poli budú uložené zálohy serverov.

Programy: Iné projekty

7.) SANET do škôl (*SANET into Schools*)

Zodpovedný riešiteľ:	Lukáš Demovič
Trvanie projektu:	1.4.2007 /
Evidenčné číslo projektu:	
Organizácia je koordinátorom projektu:	nie
Koordinátor:	SANET
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	0
Čerpané financie:	-

Dosiahnuté výsledky:

Príloha C

Publikačná činnosť organizácie

- ADCA01 F. Karlický, E. Otyepkova, R. Lo, M. Pitonak, P. Jurecka, M. Pykal, P. Hobza, M. Otyepka; Adsorption of Organic Molecules to van der Waals Materials: Comparison of Fluorographene and Fluorographite with Graphene and Graphite, *J. Chem. Theory Comput.* 13, 1328-1340 (2017).
- ADCA02 J. Skoviera, P. Neogrady, F. Louis, M. Pitonak, I. Cernusak; Caesium hydride: MS-CASPT2 potential energy curves and A(1)Sigma(+)-> X-1 Sigma(+) absorption/emission spectroscopy, *J. Chem. Phys.* 146 (10), 104304, (2017).
- ADCA03 A. Malastova, J. Vallo, A. Almassy, M. Pitonak, P. Neogrady, R. Sebesta; Fe-Li Interactions in Ferrocenyllithium Compounds, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2, 483-488, (2017).
- ADCA04 A. Uhrinova, J. Kuchar, A. Orendacova, M. Pitonak, J. Federic, J. Noga, J. Cernak; [Ni(bpy)(mal)(H₂O)(3)]center dot H₂O and [Ni(4,4-dmbpy)(mal)(H₂O)(3)]center dot 1.5H(2)O: syntheses, crystal structures, magnetic properties, and computational study of stacking interactions, *J. Coord. Chem.* 70 (17), 2999-3018, (2017).

Citácie:

- ADCA01 R. Sedlak, T. Janowski, M. Pitonak, J. Rezac, P. Pulay, P. Hobza; Accuracy of quantum chemical methods for large noncovalent complexes, *J. Chem. Theory Comput.* 9, 3364-3374 (2013).
1. [1.1] Hopmann, K.H. : *Organometallics*, Vol. 35, No. 22, 2016 \ s. 3795-3807 \t SCI
 2. [1.1] He, Y. - Wang, Y.B. : *Acta Physico-Chimica Sinica*, Vol. 32, No. 11, 2016 \ s. 2709-2716 \t SCI
- ADCA02 M. Sulka, M. Pitonak, I. Cernusak, M. Urban, P. Neogrady; Ab initio study of many-body decomposition of the interaction energy in small beryllium clusters Be₃-6, *Chem. Phys. Letters* 573, 8-14 (2013).
1. [1.1] Kalemios, A. : *Journal of Chemical Physics*, Vol. 145, No. 21, 2016 \s Art. No. 214302 \t SCI
 2. [1.1] Salehzadeh, S. - Maleki, F. : *Journal of Computational Chemistry*, Vol. 37, No. 32, 2016 \s s. 2799-2807 \t SCI
- ADCA03 J. Bostrom, M. Pitonak, F. Aquilante, P. Neogrady, T. B. Pedersen, R. Lindh; Coupled cluster and Moller-Plesset perturbation theory calculations of noncovalent intermolecular interactions using density fitting with auxiliary basis sets from Cholesky decompositions, *J. Chem. Theory Comput.* 8, 1921-1928, (2012).
1. [1.1] Bozkaya, U. - Sherrill, C.D. : *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 17, 2016, 174103
 2. [1.1] Dutta, A.K. - Neese, F. - Izsak, R. : *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 3, 2016, 034102

- ADCA04 J. Granatier, M. Pitonak, P. Hobza; Accuracy of several wave function and density functional theory methods for description of noncovalent interaction of saturated and unsaturated hydrocarbon dimers, *J. Chem. Theory Comput.* 8, 2282-2292, (2012).
1. [1.1] Mardirossian, N. - Head-Gordon, M. : *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 9, 2016, 4303-4325
 2. [1.1] Mardirossian, N. - Head-Gordon, M.: *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 21, 2016, 214110
 3. [1.1] Beran, G.J.O. : *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5567-5613
 4. [1.1] Skelton, A.A. - Khedkar, V.M. - Fried, J.R.: *Journal of Biomolecular Structure & Dynamics*, Vol. 34, No. 3, 2016, 529-539
 5. [1.1] Cervinka, C. - Fulem, M. - Ruzicka, K. : *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 6, 2016. 064505
- ADCA05 R. Sedlak, K. E. Riley, J. Rezac, M. Pitonak, P. Hobza; MP2.5 and MP2.X: Approaching CCSD(T) quality description of noncovalent interaction at the cost of a single CCSD iteration, *Chemphyschem* 14, 698-707 (2013).
1. [1.1] Schneider, W.B. - Bistoni, G. - Sparta, M. - Saitow, M. - Riplinger, C. - Auer, A.A. - Neese, F. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 10, 2016, 4778-4792
 2. [1.1] Brauer, B. - Kesharwani, M.K. - Kozuch, S. - Martin, J.M.L. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, No. 31, 2016, 20905-20925
 3. [1.1] Sieranski, T. *Structural Chemistry*, Vol. 27, No. 4, 2016, 1107-1120
 4. [1.1] Gao, T. - Li, H.Z. - Li, W.Z. - Li, L. - Fang, C. - Li, H. - Hu, L.H. - Lu, Y.H. - Su, Z.M. *Journal of Cheminformatics*, Vol. 8, 2016, 24
 5. [1.1] Beran, G.J.O. *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5567-5613
 6. [1.1] Liu, F. - Du, L.K. - Zhang, D.J. - Gao, J. *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 116, No. 9, 2016, 710-717
 7. [1.1] Fominykh, O.D. - Sharipova, A.V. - Balakina, M.Y. *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 116, No. 2, 2016, 103-112
- ADCA06 R. Sedlak, T. Janowski, M. Pitonak, J. Rezac, P. Pulay, P. Hobza; Accuracy of quantum chemical methods for large noncovalent complexes, *J. Chem. Theory Comput.* 9, 3364-3374 (2013).
1. [1.1] Nagy, P.R. - Samu, G. - Kallay, M. : *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 10, 2016, 4897-4914
 2. [1.1] Brandenburg, J.G. - Bates, J.E. - Sun, J. - Perdew, J.P. : *Physical Review B*, Vol. 94, No. 11, 2016, 115144
 3. [1.1] Silva, N.J. - Machado, F.B.C. - Lischka, H. - Aquino, A.J.A. : *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, No. 32, 2016, 22300-22310
 4. [1.1] Mao, Y.Z. - Horn, P.R. - Mardirossian, N. - Head-Gordon, T. - Skylaris, C.K. - Head-Gordon, M. : *Journal of Chemical Physics*, Vol. 145, No. 4, 2016, 044109
 5. [1.1] Yilmazer, N.D. - Korth, M. : *Current Medicinal Chemistry*, Vol. 23, No. 20, 2016, 2101-2111
 6. [1.1] Yu, F. - Fu, L.X. *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 116, No. 15, 2016, 1166-1172

7. [1.1] Otero-de-la-Roza, A. - DiLabio, G.A. - Johnson, E.R. : *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 7, 2016, 3160-3175
8. [1.1] Goel, H. - Butler, C.L. - Windom, Z.W. - Rai, N. : *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 7, 2016, 3295-3304
9. [1.1] Venkataramanan, N.S.: *Journal of Molecular Modeling*, Vol. 22, No. 7, 2016, 151
10. [1.1] Yilmazer, N.D. - Korth, M.: *International Journal of Molecular Sciences*, Vol. 17, No. 5, 2016, 742
11. [1.1] Brandenburg, J.G. - Caldeweyher, E. - Grimme, S.: *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, No. 23, 2016, 15519-15523
12. [1.1] Cernusak, I. - Urban, M. - Kello, V. - Noga, J. : *Chemické Listy*, Vol. 110, No. 5, 2016, 376-384
13. [1.1] Grimme, S. - Hansen, A. - Brandenburg, J.G. - Bannwarth, C. : *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5105-5154
14. [1.1] Christensen, A.S. - Kubar, T. - Cui, Q. - Elstner, M. : *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5301-5337
15. [1.1] Beran, G.J.O. : *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5567-5613
16. [1.1] Frey, J.A. - Holzer, C. - Klopper, W. - Leutwyler, S. : *Chemical Reviews*, Vol. 116, No. 9, 2016, 5614-5641
17. [1.1] Sure, R. - Brandenburg, J.G. - Grimme, S. : *ChemistryOpen*, Vol. 5, No. 2, 2016, 94-109
18. [1.1] Pavosevic, F. - Pinski, P. - Riplinger, C. - Neese, F. - Valeev, E.F. : *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, No. 14, 2016, 144109
19. [1.1] Muhlbach, A.H. - Vaucher, A.C. - Reiher, M. : *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 12, No. 3, 2016, 1228-1235

GII Rôzne publikácie a dokumenty, ktoré nemožno zaradiť do žiadnej z predchádzajúcich kategórií

GII01 BARKA, Ivan - BETÁK, Juraj - BUCHA, Tomáš - CEBECAUER, Tomáš - FERANEC, Ján - HAGUE IGONDOVÁ, Miroslava - HEFTY, Ján - HERDA, Pavol - HLAVÁČ, Tomáš - HUSÁRIK, Marek - JANÁK, Juraj - KAŇÁK, Ján - KUDELA, Karel - MIŠKOVÁ, Monika - NOVÁČEK, Jozef - NOVÁKOVÁ, Martina - SVIČEK, Michal - SVOREŇ, Ján - ŠÚRI, Marcel - TAKÁČ, Jozef. Meniace sa Slovensko očami satelitov [elektronický zdroj]. Editor Ján Feranec. Bratislava : Veda, 2012. DVD + 72 s. textová časť. Názov z DVD. Požaduje sa Adobe Flash Player. ISBN 978-80-224-1285-8.

Citácie:

1. [1.1] ŽONCOVÁ, M., DUBCOVÁ, A., KRAMÁREKOVÁ, H. Identification of changes in the microregion Termal on aerial photos. In *Central Europe Area in View of Current Geography : proceedings of 23rd Central European conference*. Brno : Masaryk University, 2016, s. 23-30. ISBN 978-80-210-8314-1., WOS

Príloha D

Údaje o pedagogickej činnosti organizácie

Semestrálne prednášky:

doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD.

Názov semestr. predmetu: Pokročilá numerická matematika a programovanie

Počet hodín za semester: 20

Názov katedry a vysokej školy: Prírodovedecká fakulta UK, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie

doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD.

Názov semestr. predmetu: Vybrané kapitoly z teoretickej a počítačovej chémie

Počet hodín za semester: 20

Názov katedry a vysokej školy: Prírodovedecká fakulta UK, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie

doc. Ing. Martin Šperka, PhD.

Názov semestr. predmetu: Programovanie GUI v Jave (predn. a cvičenia))

Počet hodín za semester: 68

Názov katedry a vysokej školy: Paneurópska vysoká škola, Fakulta informatiky

Semestrálne cvičenia:

doc. Ing. Martin Šperka, PhD.

Názov semestr. predmetu: Objektové programovanie

Počet hodín za semester: 24

Názov katedry a vysokej školy: Paneurópska vysoká škola, Fakulta informatiky

Semináre:

Terénne cvičenia:

Individuálne prednášky:

Príloha E**Medzinárodná mobilita organizácie****(A) Vyslanie vedeckých pracovníkov do zahraničia na základe dohôd:**

Krajina	D r u h d o h o d y					
	MAD, KD, VTS		Medziústavná		Ostatné	
	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní
Počet vyslaní spolu						

(B) Prijatie vedeckých pracovníkov zo zahraničia na základe dohôd:

Krajina	D r u h d o h o d y					
	MAD, KD, VTS		Medziústavná		Ostatné	
	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní
Španielsko					Adrián Rodríguez Bazaga	53
Veľká Británia					Andreas Neophytou	60
Počet prijatí spolu					2	113

(C) Účasť pracovníkov pracoviska na konferenciách v zahraničí (nezahrnutých v "A"):

Krajina	Názov konferencie	Meno pracovníka	Počet dní
Španielsko	PRACE Days 2017	Lukáš Demovič	3
		Michal Pitoňák	3
Spolu	1	2	6

Vysvetlivky: MAD - medziakademické dohody, KD - kultúrne dohody, VTS - vedecko-technická spolupráca v rámci vládnych dohôd

Skratky použité v tabuľke C:

PRACE Days 2017 - PRACE Days2017 - HPC for Innovation when Science meets Industry

Príloha F**Vedecko-popularizačná činnosť pracovníkov organizácie SAV**

Meno	Spoluautori	Typ¹	Názov	Miesto zverejnenia	Dátum alebo počet za rok
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.		IN	Ako to naozaj je so superpočítačom Aurel	blog.sme.sk	15.12.2017
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.		PB	Girl's Day	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	27.4.2017
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.		PB	Mladý digitálny Európan	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	5.6.2017
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.	Doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD., Mgr. Filip Holka PhD.	RO	Ako funguje superpočítač Aurel?	Rádio Regina	5.12.2017
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.	Doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD., Mgr. Filip Holka PhD., MSc. Miloslav Valčo	PB	Týždeň vedy a techniky - 5 rokov Aurela	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	7.11.2017
Mgr. Lukáš Demovič, PhD.	Doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD., RNDr. Gabriela Obadalová, Mgr. Filip Holka PhD.	iné	Európska noc výskumníkov 2017	Stará tržnica, Bratislava	29.9.2017
Ing. Michal Kadúč	Ing. Imrich Lenharčík, Pavol Herda, RNDr. Ľubomír Valenčík, CSc., Ing. Jozef Šurka, Ing. Viktor Valentíny	PB	Týždeň vedy a techniky - Sme tu pre Vás, predstavenie služieb VS SAV	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	8.11.2017
Ing. Štefan Kohút		IN	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	vedanadosah.cvtisr.sk	25.9.2017
Ing. Imrich Lenharčík		PB	Školenie - myšlienkové mapy	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	13.12.2017
RNDr. Gabriela Obadalová		PB	Školenie - ADOBE Photoshop	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	2.11.2017
RNDr. Gabriela Obadalová		PB	Školenie - ADOBE Photoshop	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	29.11.2017
Jaromír Suchánek, PhD.		PB	Školenie - Jazyk C/C++ pre pokročilých	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	25.10.2017
Jaromír Suchánek, PhD.		PB	Školenie - Jazyk C/C++ pre pokročilých	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	26.10.2017
Jaromír Suchánek, PhD.		PB	Školenie - Jazyk C/C++ pre začiatočníkov	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	27.9.2017
doc. Ing. Martin		TV	Interview k	TV JOJ	14.6.2017

Šperka, PhD.			príležitosti výročia počítačovej myši		
doc. Ing. Martin Šperka, PhD.	prof. Nemoga, prof. Kalaš, prof. Molnár, Ing. Budínska, PhD., ...	IN	Ako ďalej v informatike. Problémy a možné riešenia (online panelová diskusia)	portál CVTI	25.10.2017
Ing. Viktor Valentíny		PB	Školenie - Microsoft Office - Excel	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	14.11.2017
Ing. Viktor Valentíny		PB	Školenie - Microsoft Office - PowerPoint	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	22.11.2017
Ing. Viktor Valentíny		PB	Školenie - Microsoft Office - Word I	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	11.9.2017
Ing. Viktor Valentíny		PB	Školenie - Microsoft Office - Word II	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	2.10.2017
Bc. Blažej Vučkovski		PB	Školenie - Operačný systém Linux	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	20.9.2017
Bc. Blažej Vučkovski		PB	Školenie - Operačný systém Linux	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	9.11.2017
Bc. Blažej Vučkovski		PB	Školenie - Operačný systém Linux pokročilé funkcie	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	6.12.2017
Bc. Blažej Vučkovski		PB	Školenie - Operačný systém Linux pokročilé funkcie	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	18.10.2017
doc. Ing. Martin Šperka, PhD.	Ing. Štefan Kohút	EX	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku	Stála výstava dejín výpočtovej techniky na Slovensku, Bratislava	36
Bc. Blažej Vučkovski	MSc. Miloslav Valčo	EX	Prehliadka superpočítača Aurel	Výpočtové stredisko SAV, Bratislava	10

¹ PB - prednáška/beseda, TL - tlač, TV - televízia, RO - rozhlas, IN - internet, EX - exkurzia, PU - publikácia, MM - multimédia, DO - dokumentárny film